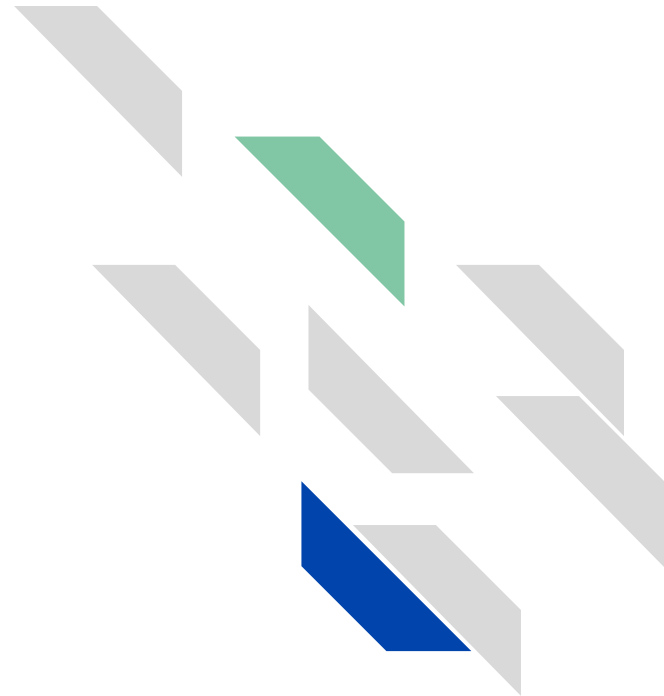


Компьютерное моделирование образования и роста оксидной пленки на поверхности ферритно-мартенситной стали под действием облучения

Выполнил Лужанский Н.В.
Научный руководитель Ганченкова М.Г.

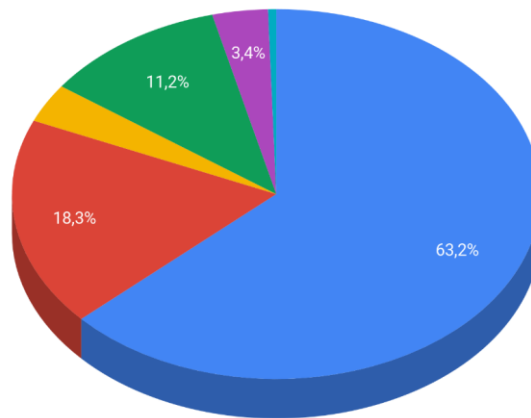
Постановка задачи



Реактор БН

Реакторы по распространенности

- ВВЭР
- ВВР
- ГГР
- РНВР
- РБМК
- БН



Постановка
задачи

Теория и
эксперимент

Методология

Компьютерный
эксперимент

Выводы



Реактор БН

Особенности:

1. Возможно замкнуть цикл использования ядерного топлива;
2. В качестве теплоносителя используется высококипящий, радиационно стойкий свинцовый теплоноситель;
3. Отсутствие высокого давления в активной зоне.

Проблемы:

1. Каков оптимальный уровень кислородного потенциала в свинце?
2. Как будут вести себя оболочки ТВЭЛ-ов под облучением и в окружении расплавленного свинца?

Постановка задачи

Теория и эксперимент

Методология

Компьютерный эксперимент

Выводы



Цель работы

Теоретическое изучение особенностей взаимодействия кислорода с поверхностью ферритно-мартенситной стали, на начальных стадиях образования оксидной пленки на поверхности металла и возможных эффектов влияния облучения на этот процесс.

Постановка
задачи

Теория и
эксперимент

Методология

Компьютерный
эксперимент

Выводы

Кандидатные материалы

Требования к материалу

1. Коррозионная стойкость;
2. Радиационная стойкость.

Постановка
задачи

Теория и
эксперимент

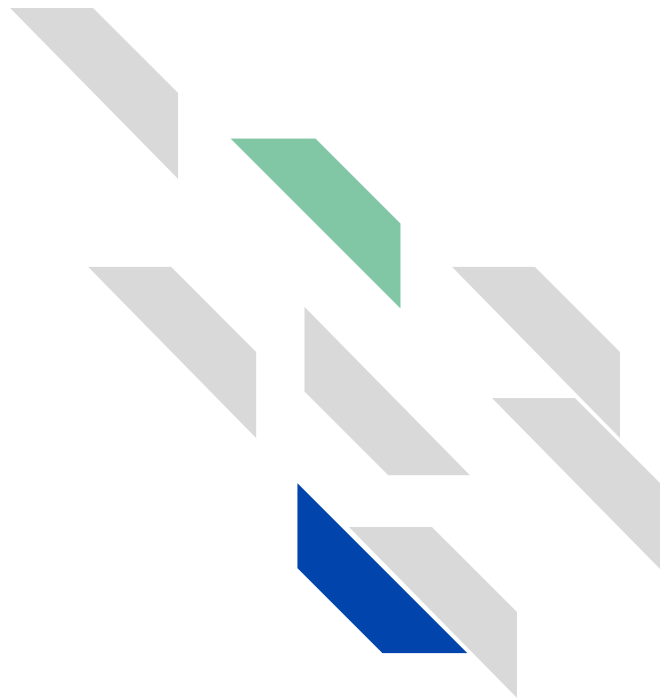
Методология

Компьютерный
эксперимент

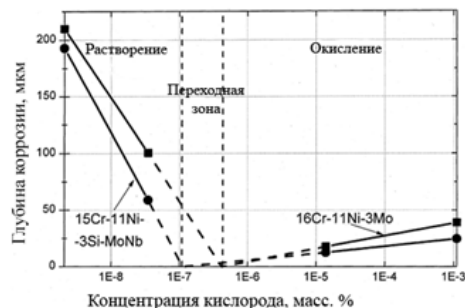
Выводы

| Марка стали | Содержание основных легирующих элементов, мас.% | | | | | | | |
|-------------------------|---|-----------|---------|---------|-----|---------|---------|-------------------------|
| 16X12MBCБФР (ЭП-823) | C | Cr | Mo | V | W | Nb | B | Другие |
| | 0,14-0,18 | 10,0-12,0 | 0,6-0,9 | 0,2-0,4 | 0,7 | 0,2-0,4 | 0,0-0,6 | 0,5-0,8Ni; 1,1-1,3Si |

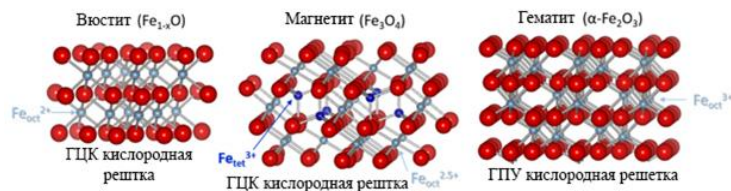
Теория и эксперимент



Кислород в свинце



Коррозионное поведение стали в расплаве свинца после 3000 часов при температуре 550 °С.



Оксиды железа

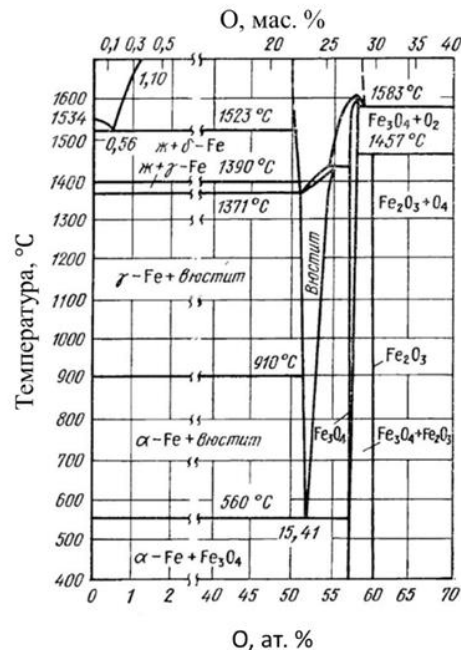


Диаграмма состояния Fe-O

Постановка задачи

Теория и эксперимент

Методология

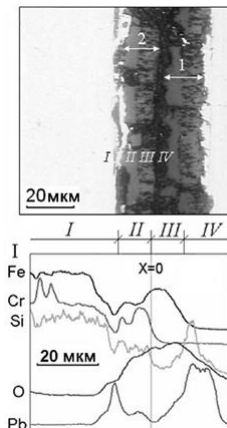
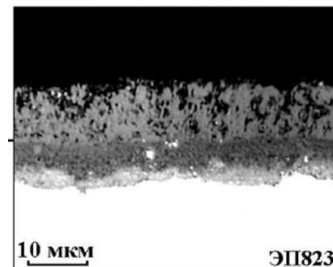
Компьютерный эксперимент

Выводы

Окисление стали

На поверхности стали ЭП-823 формируется двухслойный оксид.

1. Зона III состоит в основном из железа и кислорода.
2. Зона II обогащена хромом.
3. Расплав проникает на границу раздела «оксид/матрица», и в матрице фиксируется двойной пик хрома (зона I)



Снимок оксидной пленки на стали ЭП823
через 1100 часов и 2000 часов
нахождения в жидком свинце

Постановка
задачи

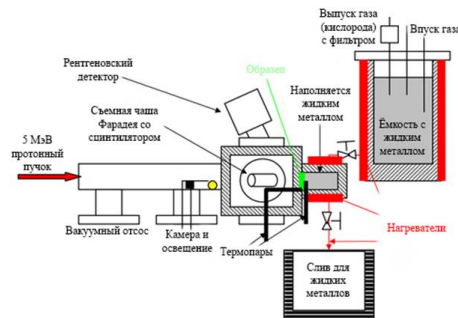
Теория и
эксперимент

Методология

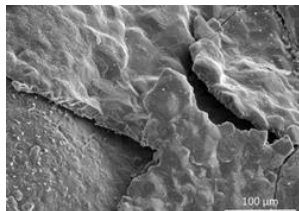
Компьютерный
эксперимент

Выводы

Окисление стали под облучением



Схематическая иллюстрация экспериментальной установки ICE-I



Отслоение оксидного слоя от поверхности образца

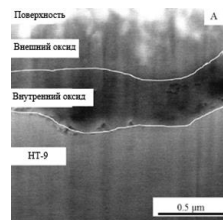


а

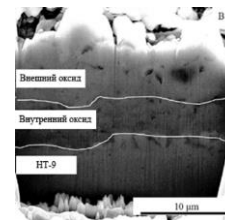


б

а – сторона пучка; б – сторона теплоносителя
Изображение образца после испытаний



а



б

а – не облученная зона; б – облученная
Сечение SEM-изображения многослойной оксидной структуры в образце

Постановка задачи

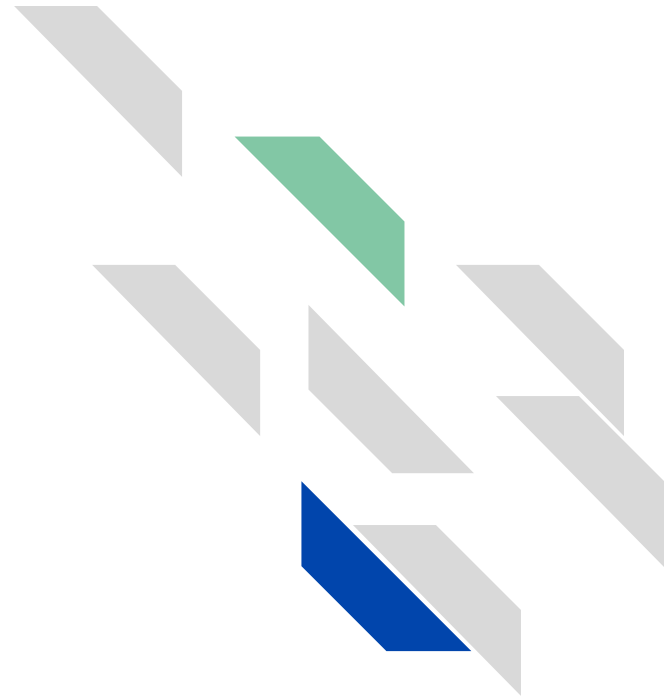
Теория и эксперимент

Методология

Компьютерный эксперимент

Выводы

Методология



Молекулярная динамика и статика

Особенности молекулярной динамики:

1. Решаются уравнения Ньютона;
2. Используются многочастичные потенциалы;
3. Моделирование эволюционных процессов.

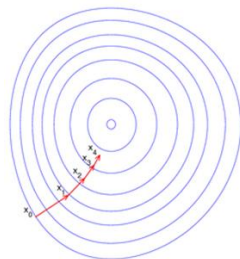
$$\vec{R}(t + \Delta t) = 2\vec{R}(t) - \vec{R}(t - \Delta t) + \vec{a}(t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4)$$

$$\vec{v}(t) = \frac{1}{2}\Delta t(\vec{R}(t + \Delta t) - \vec{R}(t - \Delta t) + O(\Delta t^2))$$

$$\vec{a}(t) = -\frac{\nabla U(\vec{r})}{m}$$

Особенности молекулярной статистики:

1. Используются алгоритмы минимизации;
2. Используются многочастичные потенциалы;
3. Моделируется конфигурация атомов при абсолютном нуле.



Последовательные приближения к точке экстремума в направлении наискорейшего спуска в случае дробного шага.

Постановка задачи

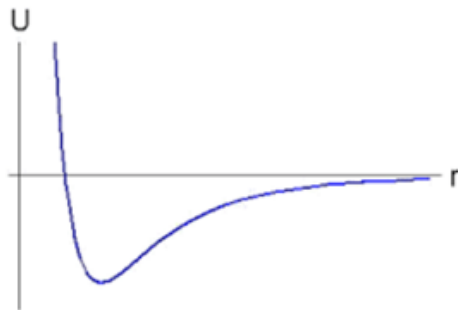
Теория и эксперимент

Методология

Компьютерный эксперимент

Выводы

Выбор потенциала



Характерный вид парных потенциалов

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \sum_i U_1(\vec{r}_i) + \sum_i \sum_{j>i} U_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + \dots,$$



$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = U_{\text{ат}} + U_{\text{зарядовая}}(q)$$



$$\begin{aligned} E_{\text{системы}} &= E_{\text{связи}} + E_{\text{недокоординатная}} + E_{\text{сверхкоординатная}} \\ &+ E_{\text{валентности}} + E_{\text{штрафная}} + E_{\text{торсионная}} \\ &+ E_{\text{соединительная}} + E_{\text{Ван-дер-Ваальсова}} + E_{\text{Кулона}} \end{aligned}$$

Постановка
задачи

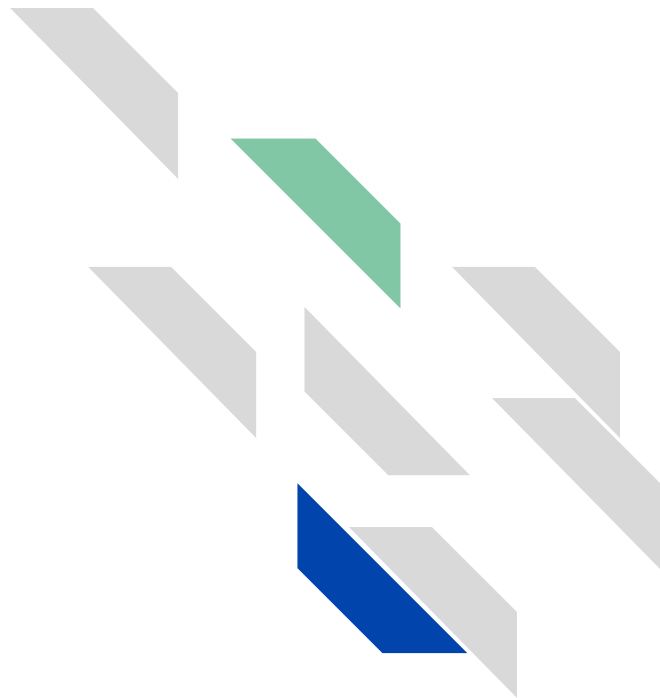
Теория и
эксперимент

Методология

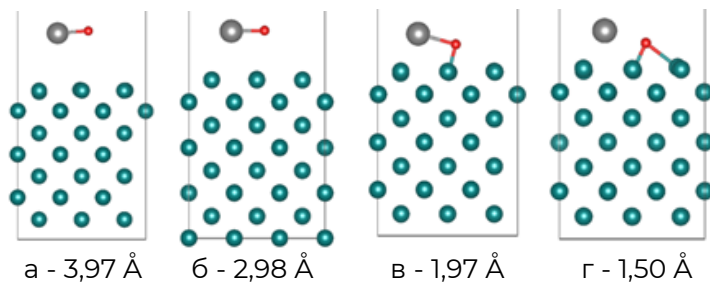
Компьютерный
эксперимент

Выводы

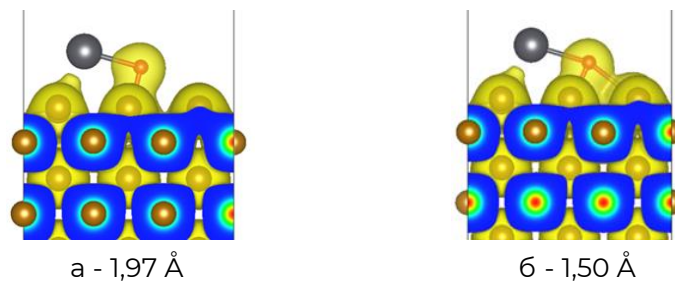
Компьютерный эксперимент



Взаимодействие молекулы с поверхностью



Взаимодействие поверхности железа с оксидом свинца на различных расстояниях



Зарядовая плотность взаимодействия свободной поверхности железа с молекулой оксида свинца на различных расстояниях

Постановка задачи

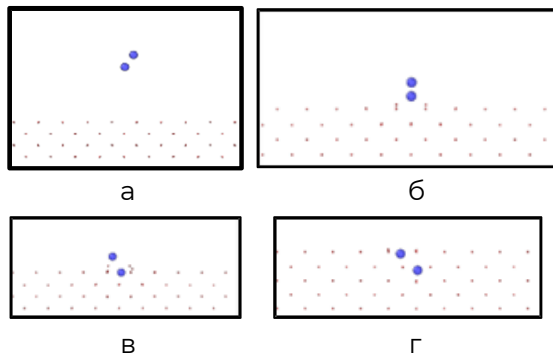
Теория и эксперимент

Методология

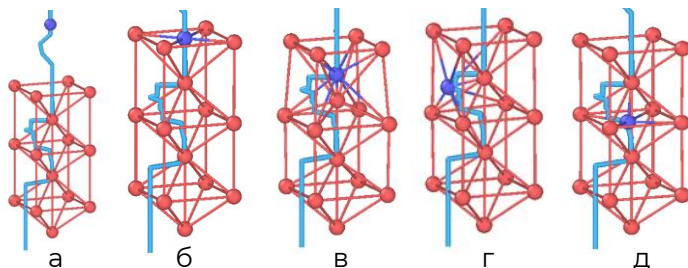
Компьютерный эксперимент

Выводы

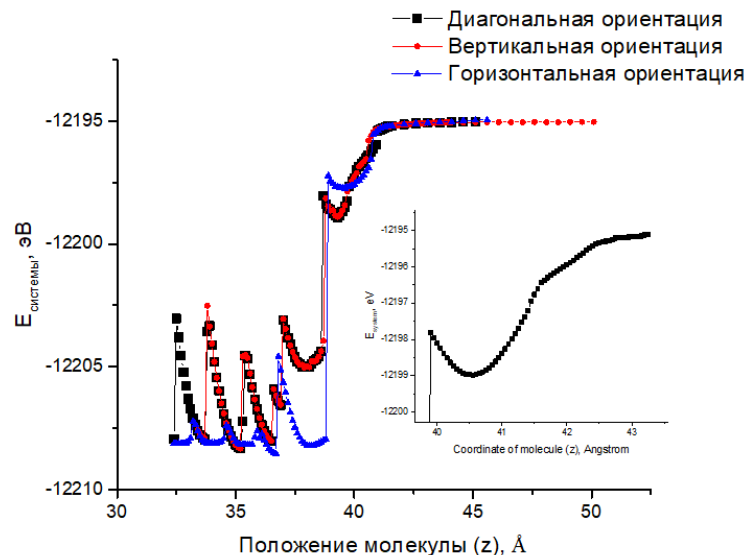
Кислород в решетке



Последовательные стадии продвижения кислорода в процессе моделирования.



Перемещение атома кислорода в решетке.



Зависимость энергии системы от расстояния смещаемого атома кислорода до первого слоя атомов железа для диагональной, горизонтальной и вертикальной начальной ориентации молекулы кислорода.

Постановка задачи

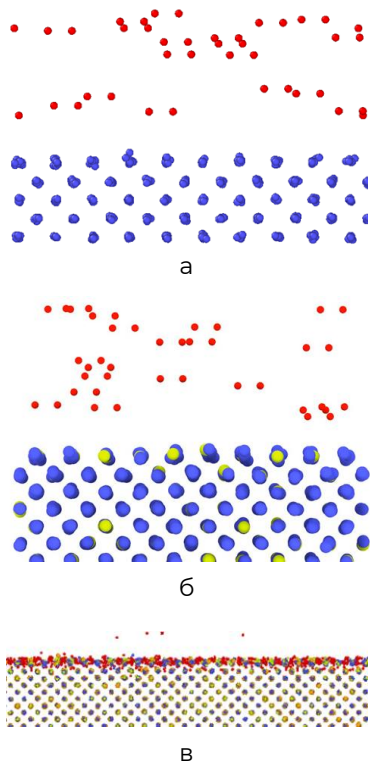
Теория и эксперимент

Методология

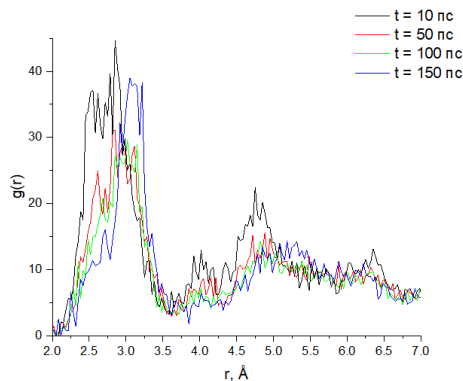
Компьютерный эксперимент

Выводы

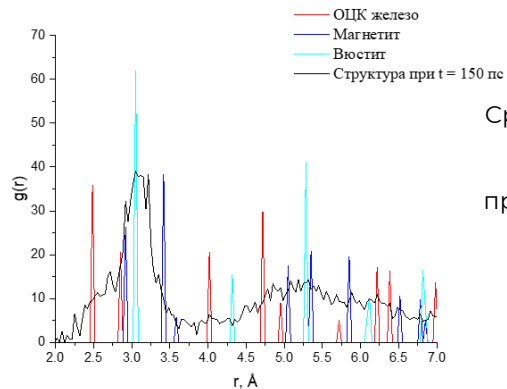
Окисление поверхности



Конфигурация атомов в расчетной ячейке при моделировании взаимодействия молекулярного кислорода с поверхностью.



Функция радиального распределения типа Fe-Fe для атомов в приповерхностных слоях моделируемого кристаллита при различных временах моделирования



Сравнение данных структурного анализа приповерхностных слоев с референсными структурами

Постановка задачи

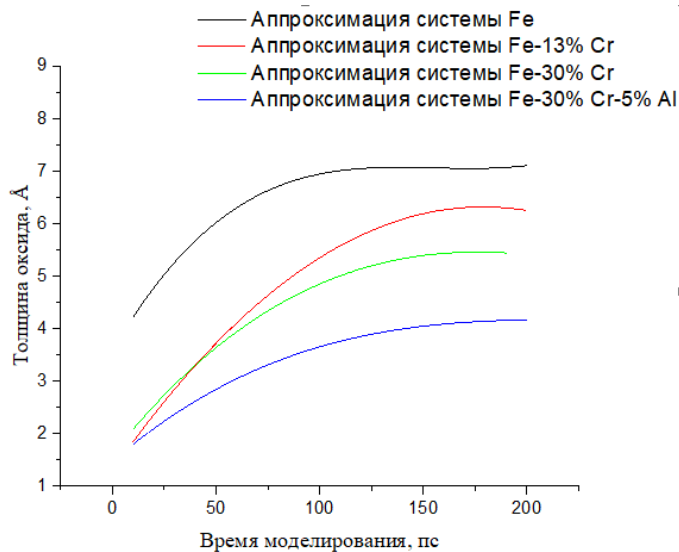
Теория и эксперимент

Методология

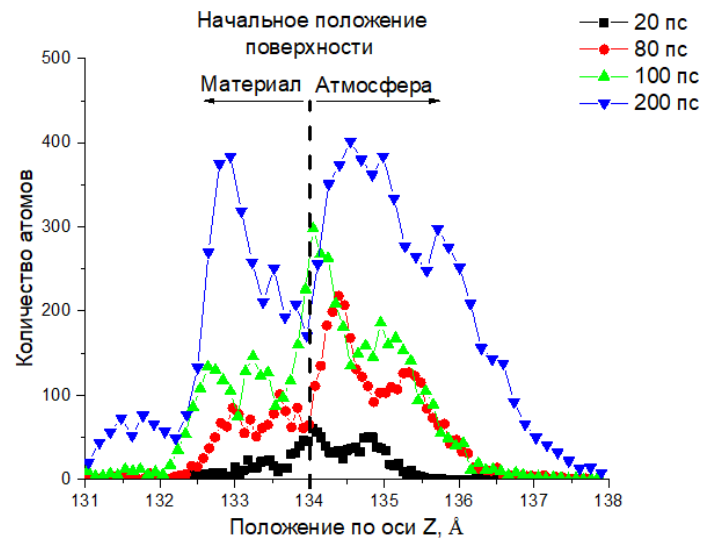
Компьютерный эксперимент

Выводы

Окисление поверхности



Сравнение аппроксимаций толщины оксидной пленки для систем железа без хрома, с хромом и с хромом и алюминием



Концентрация кислорода в приповерхностной зоне в различные моменты времени

Постановка задачи

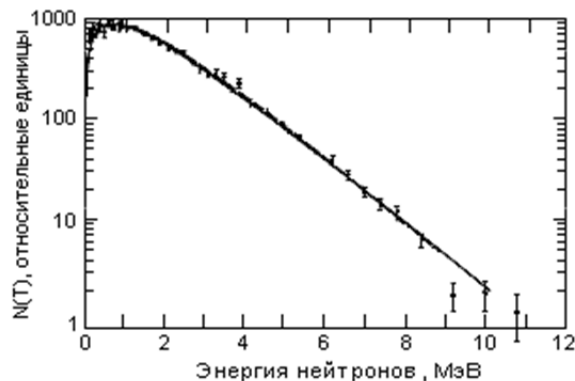
Теория и эксперимент

Методология

Компьютерный эксперимент

Выводы

Каскады столкновений



$$T = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_0 \sin^2 \frac{\theta}{2}$$



$$T_{\text{макс}} = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_0 = 0.069 E_0$$



$$E_0 = 0.1 \div 1 \text{ МэВ}$$



$$T_{\text{макс}} = 6,9 \div 69 \text{ кэВ}$$

Постановка задачи

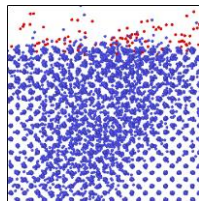
Теория и эксперимент

Методология

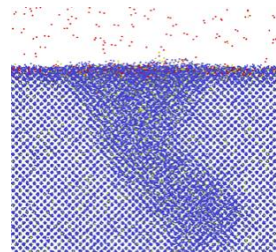
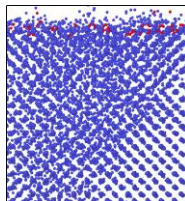
Компьютерный эксперимент

Выводы

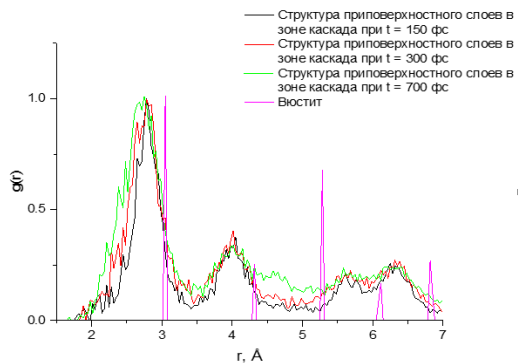
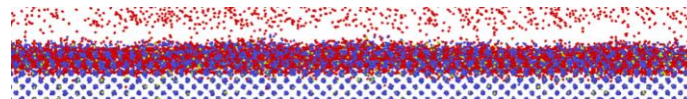
Каскады столкновений



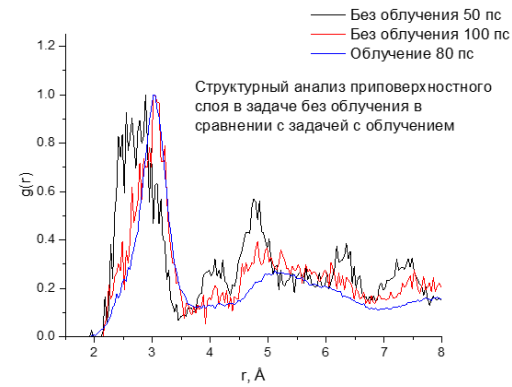
Развитие каскада от
первично выбитого
атома железа с
энергией 10 кэВ



Область каскада после
3 пс и 100 пс после
начала каскада.



Структурный анализ
железа после
прохождения каскада



Постановка
задачи

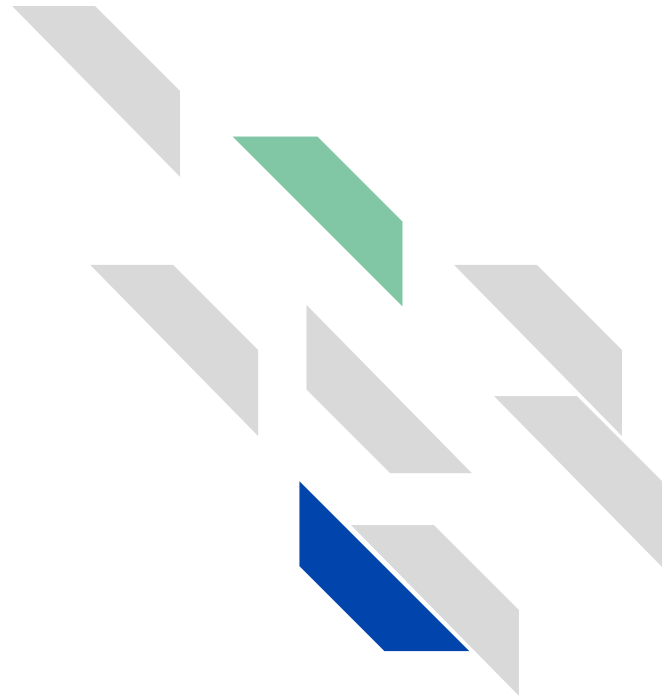
Теория и
эксперимент

Методология

Компьютерный
эксперимент

Выводы

Выводы





Выводы

- Показано, что молекула H_2O в результате взаимодействия с поверхностью железа диссоциирует с образованием атомарного кислорода, который может диффундировать вглубь материала по октаэдрическим пустотам;
- На начальных этапах окисления железа оксидная пленка формируется со структурой вюстита;
- Легирование железа хромом и алюминием не приводит к изменению структуры оксидной пленки, растущей на начальном этапе. Скорость роста оксидной пленки замедляется с увеличением концентрации легирующих элементов;

Постановка
задачи

Теория и
эксперимент

Методология

Компьютерный
эксперимент

Выводы



Выводы

- Показано, что замедление роста оксидной пленки с увеличением концентрации легирующих элементов связано с подавлением диффузионной подвижности кислорода в железе за счет взаимодействия кислорода с легирующими элементами;
- Облучение нейтронами с энергией в интервале не приводит к изменению формирования пленки на начальном этапе ее роста. Характер влияния легирующих элементов также сохраняется для случая окисления без облучения.

Постановка
задачи

Теория и
эксперимент

Методология

Компьютерный
эксперимент

Выводы